

Работа выполнена при поддержке программы фундаментальных исследований УрО РАН, проект № 15-9-3-34.

ДЕФЕКТНАЯ СТРУКТУРА И СВЯЗАННЫЕ С НЕЙ СВОЙСТВА МАЙЕНИТА

Степарук А.С., Цветков Д.С., Зувев А.Ю.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Майенит – оксоалюминат кальция $\text{Ca}_{12}\text{Al}_{14}\text{O}_{33}$, обладающий кубической кристаллической решеткой пространственного типа граната (пироп), пространственная группа I-43d; параметр решетки $a = 11.989\text{\AA}$. Минерал со структурой майенита впервые описал Хеншель [1]. В настоящее время майенит вызывает повышенный интерес, благодаря необычному сочетанию физико-химических свойств, таких как кислород-ионная проводимость, поглощение воды, обуславливающее возможность протонной проводимости, каталитическая активность.

Настоящая работа посвящена изучению физико-химических свойств майенита.

Майенит был получен стандартной керамической технологии на воздухе. В качестве исходных реагентов использовали Al_2O_3 и CaCO_3 , взятые в эквимольных соотношениях. Полученную шихту перетирали в среде этилового спирта, прессовали в таблетки и/или бруски под давлением 40-60 бар и обжигали при температуре 1300 °С в течение 24 часов. Фазовый состав синтезированных образцов контролировали рентгено-фазовым анализом. Исследование проводили с помощью дифрактометра Equinox 3000 (Inel, France) в Cu K α -излучении.

Измерения относительного расширения спеченных керамических образцов с увеличением температуры были проведены на dilatометре DIL 402 C фирмы Netzsch GmbH на воздухе в атмосферах с различными значениями $p(\text{H}_2\text{O})$ в температурном интервале 298–1473 К со скоростью нагрева и охлаждения 5 К/мин. Для необходимого задания $p(\text{H}_2\text{O})$ использовали ряд осушителей: оксид фосфора (V), силикагель, а также гигростаты (насыщенные растворы солей): LiCl, KBr.

Методом термогравиметрического анализа была изучена гидратация майенита в интервале температур 298–1373 К в атмосферах с контролируемым составом $p(\text{O}_2)$ и $p(\text{H}_2\text{O})$. Исследования проводили на термовесах DynTherm LP-ST (Rubotherm GmbH, Германия).

На основе полученных экспериментальных данных была предложена модель дефектной структуры майенита.

1. Hentschel G. Mayenit, $12\text{CaO} \cdot 7\text{Al}_2\text{O}_3$, und Brownmillerit, $2\text{CaO} \cdot (\text{Al,Fe})_2\text{O}_3$, zwei neue Minerale in den Kalksteineinschlüssen der Lava des Etringer Bellerbergs // Neues Jahrb. Min. Monatsh. 1964. P. 22–29.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 13-03-96118).

СЛОЖНЫЕ ОКСИДЫ $\text{Ba}_{1-x}\text{Me}_x\text{FeO}_{3-\delta}$ (Me=Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Ho): КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И КИСЛОРОДНАЯ НЕСТЕХИОМЕТРИЯ

Дерябина К.М., Волкова Н.Е., Гаврилова Л.Я.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Перовскитоподобные оксиды на основе редкоземельных элементов и 3d-переходных металлов обладают уникальным комплексом физико-химических свойств. В связи с этим они являются перспективными материалами для использования в различных электро-химических устройствах. Учитывая актуальность данной проблемы, перед настоящей работой была поставлена следующая цель: изучить кристаллическую структуру и кислородную нестехиометрию сложнооксидных фаз общего состава $\text{Ba}_{1-x}\text{Me}_x\text{FeO}_{3-\delta}$ (Me=Pr, Nd, Sm, Eu, Gd, Ho)

Сложные оксиды состава $\text{Ba}_{1-x}\text{Me}_x\text{FeO}_{3-\delta}$, где $x=0.25 - 0.45$ были синтезированы по глицерин-нитратной технологии на воздухе и в средах с пониженным парциальным давлением кислорода. Заключительный отжиг проводили при 1100 °С с последующим медленным охлаждением до комнатной температуры. Фазовый состав полученных оксидов определяли рентгенографически. Определение параметров элементарных ячеек осуществляли с использованием программы «CelRef 4.0», уточнение кристаллической структуры – методом полнопрофильного анализа Ритвелда в программе «FullProf 2008».

По данным РФА установлено, что образцы $\text{Ba}_{1-x}\text{Me}_x\text{FeO}_{3-\delta}$ (Me= Pr, Nd) на воздухе являются однофазными в интервале составов $0.3 \leq x \leq 0.4$, а для Me = Sm, Eu, Gd, Ho образуется единственное соединение с $x = 0.375$. Рентгенограммы всех однофазных оксидов были проиндексированы в рамках кубической ячейки пространственной группы $Pm\bar{3}m$. Для всех однофазных оксидов из рентгенографических данных рассчитаны параметры элементарной ячейки и координаты атомов. С уменьшением концентрации бария и с увеличением радиуса лантанида параметры элементарной ячейки растут, что связано с размерным эффектом.